

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 5 月 25 日現在

機関番号：82110

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2011～2014

課題番号：23740282

研究課題名(和文)変分モンテカルロ法による f 電子系の価数揺らぎと有効質量の研究

研究課題名(英文)Variational Monte Carlo study of the valence fluctuations and effective mass in f-electron systems

研究代表者

久保 勝規 (KUBO, Katsunori)

独立行政法人日本原子力研究開発機構・原子力科学研究部門 先端基礎研究センター・研究副主幹

研究者番号：50391272

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000 円

研究成果の概要(和文)：f電子系の価数揺らぎや磁気秩序状態、およびそれらが有効質量などの電子状態に与える影響を調べた。

まず、伝導電子とf電子間のクーロン相互作用 U_{cf} を取り入れた拡張周期アンダーソンモデルを調べた。その結果、 U_{cf} が大きい場合にはf準位を変化させたときに、価数は単調に変化するが、有効質量は非単調に変化することがわかった。

また、通常の周期アンダーソンモデルについて、磁場中や磁気秩序状態での電子状態を調べた。その結果、磁気秩序相内でフェルミ面のトポロジーの変化する相転移(リフシッツ転移)が起こることがわかった。

研究成果の概要(英文)：We have investigated the valence fluctuations and magnetically ordered states of the f-electron systems, and the effects of them on the electronic state such as the effective mass.

First, we have studied an extended periodic Anderson model with the Coulomb interaction U_{cf} between f and conduction electrons. Then, we have found that while the valence changes monotonically with the f-electron level, the effective mass changes nonmonotonically when U_{cf} is large.

We have also investigated the electronic states under a magnetic field and/or with a magnetic order in the ordinary periodic Anderson model. We have found transitions accompanying changes in the Fermi-surface topology, called Lifshitz transitions, in the magnetically ordered states.

研究分野：物性理論

キーワード：重い電子系 価数揺らぎ 有効質量 リフシッツ転移 強相関電子系 物性理論

1. 研究開始当初の背景

重い電子系と呼ばれる物質群ではその特徴的エネルギースケールが小さいため、磁場や圧力などを加えることによって、基底状態を磁気秩序状態から無秩序状態に変えることが出来る場合がある。この相転移点は量子臨界点と呼ばれ、その近傍での揺らぎによって引き起こされる超伝導や異常な物理量の振る舞いが盛んに議論されている。研究開始当初、そのような量子臨界現象を引き起こす原因として、従来の磁気的な揺らぎだけではなく、電荷(価数)の揺らぎというものも議論されていた。

この価数揺らぎもしくは価数の急激な変化を期待する実験的な根拠は主に有効質量の変化であった。周期アンダーソンモデルにグッツヴィラー近似と呼ばれる手法を用いると、f 電子間のクーロン相互作用が十分大きいとき、有効質量 m^* は n_f を 1 サイトあたりの f 電子数、 m を相互作用の無いときの電子質量として $m^*/m=(1-n_f/2)/(1-n_f)$ となることがわかる。そのため、有効質量が急激に変化する場合、f 電子の価数が急激に変化していると期待されていた。

その有効質量はド・ハース-ファン・アルフェン効果や低温での比熱や電気抵抗 $\rho=\rho_0+AT^2$ の温度の 2 乗の係数 A から見積もることが出来る。実際に圧力による有効質量の急激な増大が CeCu_2Ge_2 や CeRhIn_5 の超伝導転移温度が最大になる圧力付近で観測されている。また超伝導体ではないが、 CeRu_2Si_2 ではメタ磁性的な異常を示す磁場付近で、有効質量の大きな変化が観測されている。メタ磁性的な異常を示す物質としては、 $\text{YbCo}_2\text{Zn}_{20}$ や $\text{YbIr}_2\text{Zn}_{20}$ で有効質量の急激な変化が報告され、その圧力や磁場依存性が詳細に調べられている。

理論的には、大きな価数揺らぎを引き起こす機構として、伝導電子と f 電子の間のクーロン相互作用 U_{cf} を取り入れることが提案されていた。実際 U_{cf} を取り入れた拡張周期アンダーソンモデルに対して、スレーブボソン法を用いた研究が行われ、価数の急激な変化と、そのような揺らぎが大きい領域で超伝導が発現することが報告されていた。

しかし、関係式 $m^*/m=(1-n_f/2)/(1-n_f)$ は U_{cf} が無いモデルに対して導かれたものであり、 U_{cf} が有限で価数揺らぎが大きい場合にどのように変更されるかは自明ではなかった。 U_{cf} による価数揺らぎに関する理論は、上記のスレーブボソン法の研究の他に、変分モンテカルロ法、1次元系に対する密度行列繰り込み群法、揺らぎ交換近似、動的平均場理論による研究があったが、価数の変化と有効質量の変化との対応についてはそれほど明確にはわかっていなかった。

このような価数揺らぎに関する精力的な理論研究、有効質量の圧力や磁場などの外部パラメーター依存性の系統的で詳細な実験的研究が進展している状況であったので、価数

揺らぎと有効質量の関係を、価数揺らぎを引き起こし得る具体的な理論模型に対して明らかにする必要があった。

2. 研究の目的

本研究の目的は、重い電子系における f 電子の価数や有効質量が圧力や磁場などの外部パラメーターによってどのように変化するかを明らかにすることである。サイトあたりの f 電子数 n_f と有効質量 m^* の関係は、相互作用の無いばあいの電子質量を m として、基本的には関係式 $m^*/m=(1-n_f/2)/(1-n_f)$ となると期待されるが、価数揺らぎを引き起こすために伝導電子と f 電子間のクーロン相互作用 U_{cf} を入れた場合に、どのように変更されるかは自明ではない。価数揺らぎが起こる系で、重い電子系の電子状態がどのように変化するかを明らかにする。

3. 研究の方法

周期アンダーソンモデルおよび U_{cf} を取り入れた拡張周期アンダーソンモデルについて、f 電子数や有効質量が磁場などの外部パラメーターによってどう変化するかを調べる。

これらの模型は、混成行列要素や全電子数など多くのパラメーターを含むので、模型の全体像を掴むためには広いパラメーター領域を調べることが必要である。この目的のためには、考える変分関数の範囲内に限られるという欠点はあるものの、計算コストが低く、かつ相関効果による重い準粒子状態の記述が出来る変分理論は有力である。

変分理論による研究は次のような手順で行われる。まず、これらの模型に対して、同一サイトでの相関効果を記述するための射影を施したグッツヴィラー型の変分波動関数を考え、その波動関数でのエネルギー期待値を求める。そして、エネルギー期待値を最小にする変分パラメーターを求め、基底状態の波動関数を決定する。その基底状態での f 電子数や有効質量が磁場などのパラメーターによってどう変化するかを調べる。この手順の中でエネルギー期待値を求める部分が最も難しい点であるが、その手法にはグッツヴィラー近似と呼ばれる方法とモンテカルロ法を用いる方法の 2 種類の手法がある。

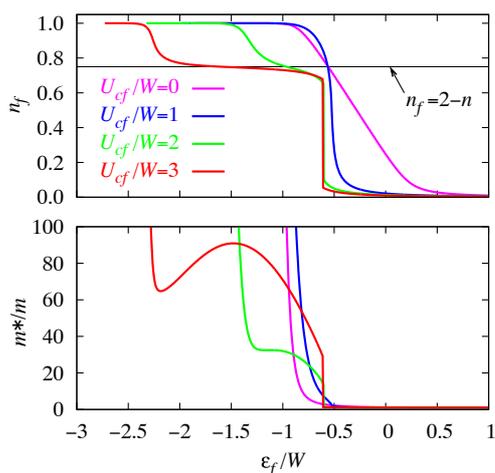
本研究では、2つの手法を適宜用いる。グッツヴィラー近似は、近似理論ではあるが、かなり正確であることも多い。実際、周期アンダーソンモデルの常磁性状態に対しては、グッツヴィラー近似による計算が行われているが、その結果は数値的に統計誤差の範囲内で厳密な変分モンテカルロ法による計算の結果とよく合う物理量も多い。

変分モンテカルロ法では、多重積分であるエネルギーや物理量の計算を、モンテカルロ法によって行う。この変分モンテカルロ法では、統計誤差の範囲内で変分関数でのエネルギー期待値を厳密に求めることができ、基底状態を近似なしに議論することが可能になる。

本研究では、これらの手法を有限磁場や磁気秩序状態、 U_{cf} がある場合などに拡張して用いる。

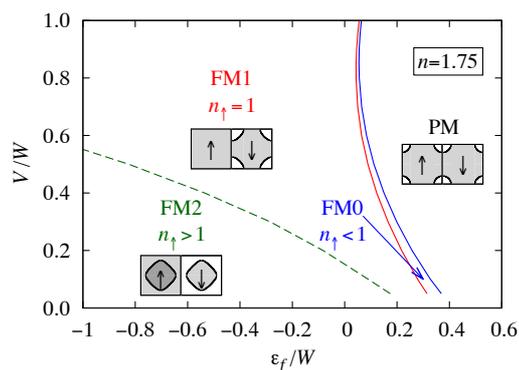
4. 研究成果

(1) 伝導電子と f 電子間のクーロン相互作用 U_{cf} を取り入れた拡張周期アンダーソンモデルについて、 U_{cf} が f 軌道の価数や有効質量に与える効果を調べた。その結果、中間的な価数の領域で有効質量が U_{cf} の効果によって増大することがわかった。これは、 U_{cf} によるエネルギーの増加を避けるために、伝導電子と f 電子が異なるサイトを占めようとして、動きにくくなるためである。この効果によって U_{cf} が大きい場合には f 準位を変化させたときに、価数は単調に変化するが、有効質量は非単調に変化することがわかった (下図)。これは、 $CeCu_2Si_2$ の圧力下での価数と有効質量の変化を定性的に説明する。またこの結果は、圧力下で有効質量が非単調に変化する場合には、価数揺らぎを発達させる相互作用が大きい可能性があるということであるから、今後の価数揺らぎの大きい物質の探索にも指針を与えるものにもなっている。



(2) U_{cf} を入れない通常の周期アンダーソンモデルについて、磁場中や磁気秩序相での電子状態をグッツヴィラー近似法と変分モンテカルロ法を用いて調べた。特に変分モンテカルロ法を用いた計算では、反強磁性状態と強磁性状態を同一の理論的枠組みで取り扱った。その結果、電子数がハーフフィールドに近い場合には反強磁性状態、ハーフフィールドから離れた場合には強磁性状態が実現することを示した。そして、どちらの磁性相の中でもフェルミ面のトポロジーの変化する相転移 (リフシツ転移) が起こることがわかった (下図に強磁性の場合の相図を示す)。これは UGe_2 などのいくつかの重い電子系で見出されている、磁性相内や磁場中での物理量の異常を説明する可能性がある。最近、特に実験的に盛んに議論されているリフシツ転移に関する微視的な理論研究として、今後

の理論および実験的研究の展開に資するものになると期待される。



5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 8 件)

- ① “Variational Monte Carlo study of magnetic states in the periodic Anderson model” K. Kubo, J. Phys.: Conf. Ser. **592**, 012039-1--012039-6 (2015). 査読有
DOI: 10.1088/1742-6596/592/1/012039
- ② “Ferromagnetic States in the Periodic Anderson Model” K. Kubo, JPS Conf. Proc. **3**, 011023-1--011023-6 (2014). 査読有
DOI: 10.7566/JSPSCP.3.011023
- ③ “Ferromagnetism and Fermi-surface transition in the periodic Anderson model: Second-order phase transition without symmetry breaking” K. Kubo, Phys. Rev. B **87**, 195127-1--195127-9 (2013). 査読有
DOI: 10.1103/PhysRevB.87.195127
- ④ “Gutzwiller method for heavy-fermion systems under a magnetic field” K. Kubo, Phys. Status Solidi C **10**, 544-548 (2013). 査読有
DOI: 10.1002/pssc.201200762
- ⑤ “Mass enhancement in an extended periodic Anderson model with valence fluctuations” K. Kubo, J. Phys.: Conf. Ser. **391**, 012159-1--012159-4 (2012). 査読有
DOI: 10.1088/1742-6596/391/1/012159
- ⑥ “Gutzwiller Method for an Extended Periodic Anderson Model with the c-f Coulomb Interaction” K. Kubo, J.

Phys. Soc. Jpn. **80**,
114711-1--114711-8 (2011). 査読有
DOI: 10.1143/JPSJ.80.114711

- ⑦ “Correlation Effects on Antiferromagnetism in Fe Pnictides” K. Kubo and P. Thalmeier, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, SA121-1--SA121-3 (2011). 査読有
DOI: 10.1143/JPSJS.80SA.SA121
- ⑧ “Mass Enhancement in an Intermediate-Valent Regime of Heavy-Fermion Systems” K. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 063706-1--063706-4 (2011). 査読有
DOI: 10.1143/JPSJ.80.063706

[学会発表] (計 13 件)

- ① 久保勝規「変分モンテカルロ法による周期アンダーソンモデルの磁性状態の研究」日本物理学会 2014 年秋季大会、2014 年 9 月 8 日、中部大学 (愛知県・春日井市)
- ② K. Kubo “Variational Monte Carlo study of magnetic states in the periodic Anderson model” The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2014), 9 July 2014, Grenoble (France)
- ③ 久保勝規「周期アンダーソンモデルの強磁性転移」第 13 回 琉球大学物性研究会、2013 年 12 月 14 日、琉球大学 (沖縄県・中頭郡西原町)
- ④ K. Kubo “Ferromagnetic States in the Periodic Anderson Model” The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2013), 6 August 2013, 東京大学 (東京都・文京区)
- ⑤ K. Kubo “Gutzwiller Theory for the Ferromagnetism in the Periodic Anderson Model” The IMR-ASRC 4th REIMEI International Workshop, 31 July and 1 August 2013, いばらき量子ビーム研究センター (茨城県・那珂郡東海村)
- ⑥ 久保勝規「グッツヴィラー近似による周期アンダーソンモデルの強磁性の研究」新学術領域「重い電子系の形成と秩序化」第 4 回研究会、2013 年 1 月 13 日、東京工業大学 (東京都・目黒区)
- ⑦ 久保勝規「周期アンダーソンモデルの強

磁性とそれに伴うフェルミ面と有効質量の変化」新学術領域「重い電子系の形成と秩序化」ワークショップ～純良単結晶育成と重い電子系のフェルミ面～、2012 年 11 月 24 日、琉球大学 (沖縄県・中頭郡西原町)

- ⑧ 久保勝規「グッツヴィラー近似による重い電子系の磁場効果の研究」日本物理学会 2012 年秋季大会、2012 年 9 月 20 日、横浜国立大学 (神奈川県・横浜市)
- ⑨ K. Kubo “Gutzwiller method for heavy-fermion systems under a magnetic field” International Conference on Quantum Criticality and Novel Phases (QCNP2012), 28 August 2012, Dresden (Germany)
- ⑩ K. Kubo “Magnetic field effect on the heavy-fermion state” 10th Prague Colloquium of f-Electron Systems (PCFES10), 24 August 2012, Prague (the Czech Republic)
- ⑪ 久保勝規「重い電子系における伝導電子-f 電子間クーロン相互作用の効果」第 11 回 琉球大学物性研究会、2011 年 11 月 12 日、琉球大学 (沖縄県・中頭郡西原町)
- ⑫ 久保勝規「重い電子系の有効質量に対する伝導電子-f 電子間クーロン相互作用の効果」日本物理学会 2011 年秋季大会、2011 年 9 月 22 日、富山大学 (富山県・富山市)
- ⑬ K. Kubo “Mass Enhancement in an Extended Periodic Anderson Model with Valence Fluctuations” The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2011), 31 August 2011, Cambridge (UK)

[その他]

ホームページ

<http://asrc.jaea.go.jp/soshiki/gr/MatPhysicsHeavyElements/PersonalPages/kubo/publication.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

久保 勝規 (KUBO, Katsunori)

独立行政法人日本原子力研究開発機構・原子力科学研究部門 先端基礎研究センター・研究副主幹

研究者番号: 50391272